



TITLE:

大自由度Hamilton力学系における 集団運動(複雑な多谷ポテンシャル エネルギー面上で生起する動力学 諸問題-タンパク質とその周辺-,研 究会報告)

AUTHOR(S):

森田, 英俊

CITATION:

森田, 英俊. 大自由度Hamilton力学系における集団運動(複雑な多谷ポテンシャルエネルギー面上で生起する動力学諸問題-タンパク質とその周辺-,研究会報告). 物性研究 2006, 86(1): 82-86

ISSUE DATE:

2006-04-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/110431>

RIGHT:

大自由度 Hamilton 力学系における集団運動*

東京大学総合文化研究科広域科学専攻[†] 森田英俊[‡]

序 散逸のある巨視的系はしばしば周期的・準周期的・カオス的な時間変動を示す。これらの振舞いは低自由度力学系として記述できる。一方で系が多くの分子から構成されていることを鑑みれば、微視的なダイナミクスは高自由度力学系のはずである。微視的な高次元運動から巨視的な低次元運動が集団運動としていかにして生じるのか。これは非線形動力学の観点からも非平衡統計力学の観点からも重要な問題である。

このような集団運動は、これまで微視的動力学が散逸系の大自由度力学系において発見され [1], 徹底的に調べあげられてきた [2-7]。一方で (比較的狭い意味の) 非平衡統計力学の立場からは、微視的動力学が保存系、すなわち大自由度 Hamilton 力学系に興味がある。

孤立した Hamilton 力学系においてこのような集団運動は見られるだろうか。統計力学の常識から言えば、これはなかなか難しそうに見える。まず平衡状態に関しては、定義より見られないし、非平衡状態でも平衡へ素早く緩和してしまう場合は定常的な流れしか見られないだろう。しかしながら系を強い非平衡状態に置くと、平衡への緩和途中にある準安定状態になり、緩和が非常に遅くなる現象がいくつか知られている。このように平衡から非常に遠い何らかの準安定状態にトラップされ、そこで低次元集団運動が現れる、すなわち過渡的な構造として集団運動が見られる、ということはある。筆者らは、ある大自由度 Hamilton 力学系の緩和過程において、系がある準安定状態に至り、そこで巨視的物理量が周期・準周期的に時間変動する例を発見した [8]。つまり、実際にあった。本稿ではこの現象について手短かに報告する。

模型 平均場 XY 模型の Hamilton 力学系、すなわち大域結合振り子系 [9-11] を考える：

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \frac{J}{2N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [1 - \cos(\theta_i - \theta_j)]. \quad (1)$$

この系の平衡状態は熱力学極限 $N \rightarrow \infty$ において厳密に求まり、一自由度当たりのエネルギー $U = \mathcal{H}/N$ にのみ依存する。

いま、運動量の分散 $T(t)$ と平均場の大きさ $M(t)$ に注目する¹：

$$T(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N p_j(t)^2, \quad M(t)e^{i\phi(t)} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N e^{i\theta_j(t)}. \quad (2)$$

*研究会「複雑な多谷ポテンシャルエネルギー面上で生起する動力学諸問題：タンパク質とその周辺」講演。その後の進展により、当日の講演内容から一部改まったところがある。

[†]現所属：早稲田大学理工学術院

[‡]morita@complex.c.u-tokyo.ac.jp

¹平均場の位相 $\phi(t)$ の運動は中立モードであり、以下で述べる現象には関係ない。

平衡においてはそれぞれ温度と磁化であることから、これらは巨視的物理量である。ただし Hamiltonian (1) により拘束条件

$$2U = T(t) + 1 - M(t)^2, \quad (3)$$

があるので、どちらか一方の時間変動を調べれば十分である。

平均場を用いると、運動方程式は次のようになる：

$$\dot{\theta}_j = p_j, \quad \dot{p}_j = -M(t) \sin(\theta_j - \phi(t)). \quad (4)$$

初期条件 あるエネルギー密度 U と、初期の平均場の大きさ $M_0 = M(0)$ とを与える。これに対し、まず $\{\theta_j\}$ の分布は、 U に関係なく、磁化 M_0 ・温度 $T_{eq}(M_0)$ ($T_{eq}(M)$ は平衡での状態方程式) の平衡分布 (Boltzmann 分布) にとる：

$$f_\theta^0(\theta; M_0) = \frac{1}{Z_\theta(M_0)} \exp \left[\frac{M_0}{T_{eq}(M_0)} \cos \theta \right], \quad (5)$$

ただし $Z_\theta(M_0)$ は規格化因子。一方 $\{p_j\}$ の分布は、拘束条件 (3) から決まる温度 $T_0(U, M_0) = 2U - 1 + M_0^2$ の Maxwell 分布にとる：

$$f_p^0(p; U, M_0) = \frac{1}{Z_p(U, M_0)} \exp \left[-\frac{p^2}{2T_0(U, M_0)} \right], \quad (6)$$

ただし $Z_p(U, M_0)$ は規格化因子。そして θ_j と p_j が独立だとして、初期分布

$$f_0(\theta, p; U, M_0) = f_\theta^0(\theta; M_0) f_p^0(p; U, M_0) \quad (7)$$

が決まる。 (U, M_0) を適当にとれば、非平衡な初期状態を与える²。ここで、 M_0 を U についての平衡値 $M_0 = M_{eq}(U)$ にとると、 f_0 は平衡分布に一致することに注意しよう。つまりこの初期条件は (U, M_0) 平面において平衡状態と接続される。

巨視的動態 ある平衡から遠い初期分布を与えて、平衡への緩和過程を観察してみよう。図1は $N = 10^3$ のときの $M(t)$ の典型的な時系列である。はじめ ($t \gtrsim 0$) $M(t)$ はほぼ指数的に平衡値に向かってゆくが、 $t \sim 10$ から平衡値より大きいある値をとり続ける。この準安定状態³は $t \sim 10^4$ まで続き、その後平衡値へと向かって対数的に近付いてゆく。準安定状態の持続時間は N とともに大きくなることから、熱力学極限で観測されることが示唆される。

この準安定状態における運動を拡大してみたものが図2である。(2)式で定義された巨視的物理量が時間的に変動している。この変動は N を大きくしても零にならず、むしろ周期的運動がきれいに見られるようになる。これは平衡近傍におけ

²適当な大きさの外部磁場をかけて平衡にしておいて、瞬間的に外部磁場を切ることに対応する。

³この模型において、臨界点 (磁性体の秩序・無秩序転移) より低エネルギー側のある領域に準安定状態があることが以前から [11] 知られており、非常に集中的に調べられている。その全ての文献を挙げることは困難なので、ここでは比較的最近のものとして [12] と [13] とを挙げ、"and references therein" ということにしたい。これに対し、我々が議論している準安定状態は臨界点を挟んで上下とも、しかもずっと広いエネルギー領域で見られる。

る揺らぎが $N^{-1/2}$ で零に近付くのと対照的である。このように、巨視的な周期的集団運動が観察された。

この集団運動は、エネルギー密度 U や初期の平均場の大きさ M_0 によって振舞いが異なる。例えば M_0 一定で U が大きくなるにつれて、「定常的→周期的→準周期的」と変わる。これは低次元散逸力学系における典型的な分岐ルートの一つ「固定点→リミットサイクル→トラス」に対応している。つまりこの集団運動の振舞いの変化は低次元力学系の分岐、特に Hopf 分岐であることが示唆される。実際、定常から周期への分岐点近傍で $M(t)$ の振幅を調べると、分岐パラメーターに対応する U に対し $M(t) \sim (U - U_c)^{1/2}$ という依存性を示す、ただし U_c は分岐点のエネルギー（図 3）。このことからこの分岐が Hopf 分岐型であることが確認できる。 U 一定で M_0 を変えたときにも同様の Hopf 分岐の性質が見られる。

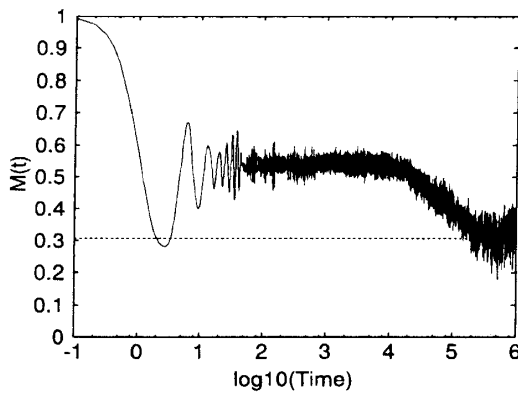


図 1: $M(t)$ の典型的な時系列. $N = 10^3$, $U = 0.69$, $M_0 = 1$. 点線は平衡値. 横軸は対数.

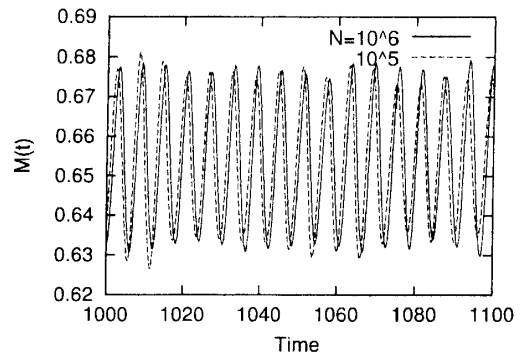


図 2: 準安定状態における $M(t)$ の運動. $U = 0.5$, $M_0 = 0.9$.

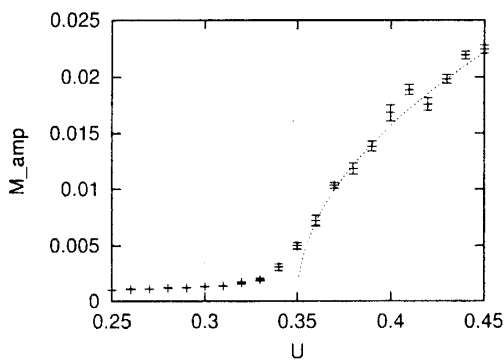


図 3: $M(t)$ の振幅のエネルギー密度依存性（「分岐点」近傍）. $N = 10^5$, $M_0 = 0.9$.

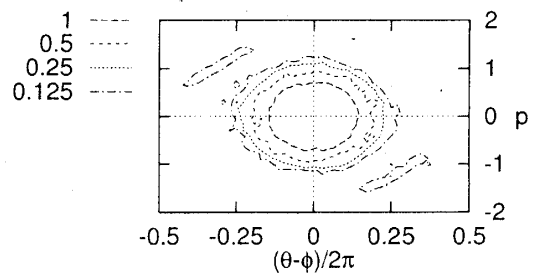


図 4: 分布 $f(\theta, p, t)$ の等高線のスナップショット. 図 2 で $t = 1001.2$ のときのもの. 平均場の位相を中心に描いてある.

微視的動態 この巨視的時間変動、特に周期運動が生じる仕組みを微視的動態から考えてみよう。図 4 は分布 $f(\theta, p, t)$ の等高線のスナップショットである。中心に

在る大きなものの他に, $((\theta - \phi)/2\pi, p) \sim (\mp 0.3, \pm 1)$ の辺りにも山が在ることが分かる. この局在部分は振り子のセパトリックスよりも外側にあり, それに属する要素は回転運動している.

この微視的状态を理解するために, 比較対象として, パラメトリックな周期外力 $M_{ext}(t)$ が加わった独立な N 個の振り子の集団を考察する:

$$\dot{\theta}_j = p_j, \quad \dot{p}_j = -M_{ext}(t) \sin \theta_j, \quad (8)$$

ただし $M_{ext}(t) = g + h \sin \Omega t$. ここで, (2) 式から「内的に」求まるこの集団の平均場を $M_{int}(t)$ とすると, もし $M_{ext}(t) = M_{int}(t)$ ならば, 元の Hamilton 力学系で観察されている自己無撞着なものと一致することに注意する. さて, まず (8) 式の Poincaré 断面を調べると, 丁度 $(\theta/2\pi, p) \sim (\mp 0.3, \pm 1)$ の辺りに, 外力の周期に対する 1:1 共鳴のトーラスの島が残っていることが分かる. また, はじめに (θ, p) 平面 (μ 空間と呼ばれる) 上に要素を対称に分布させておいても, 外力によりその対称分布が不安定化し, 分布の濃淡が生成されることも観察される.

これを基に, 元の Hamilton 力学系における巨視的周期運動に対して次のような自己無撞着な説明が与えられる. もし 1:1 共鳴の島の領域に相当な割合の要素が存在すれば, それらは (2) 式で定義される $M(t)$ に対し, 周期的に変化する有限の寄与をする. この $M(t)$ によって各要素は周期的に駆動され, それにより 1:1 共鳴は安定化する. さらに 1:1 共鳴以外の部分も分布に濃淡が出来ることにより安定性に寄与する. このようにして, 「自分で自分を励起する」仕組みが自己無撞着に安定して存在できる構造になっているのである. 勿論この構造は, ずっと長い時間スケールで見ればいずれは崩壊するのだが, 少なくともある時間領域での過渡的構造としては安定しており, しかもその持続時間は先に見たように N と共に長くなってゆく.

この描像は定常から振動への分岐 (図 3) も説明する. 1:1 共鳴の島はエネルギーがある程度大きい状態であるが, 全エネルギーが小さいと, その状態に達することができず, その結果巨視的振動状態は実現しない. ところがある程度全エネルギーが大きいと, 相当数の要素が 1:1 共鳴に十分なエネルギーを持つことができ, 巨視的振動状態が安定に存在し得る. これが定常から振動への分岐である. M_0 軸方向での分岐も同様である. すなわち U が一定で M_0 が大きくなると (3) 式より T_0 も大きくなり, 1:1 共鳴状態の実現に十分なエネルギーを持つ要素が相当数に達する.

まとめ・議論 平均場 XY 模型の Hamilton 力学系において, 巨視的物理量が周期・準周期的に振舞う集団運動を発見した. この周期運動は低次元散逸力学系と同様に Hopf 分岐により出現する. すなわち微視的保存力学系の高次元カオスから, 巨視的「散逸」力学系の低次元構造が観察された. さらにこの巨視的周期運動の起源を微視的動力学から考察し, 自己無撞着に「自分が自分を励起する」仕組みが安定して存在できる構造として説明した.

この微視的考察は, 微視的動力学に対し分子場が意味を持ち, さらにそれによる一体動力学がセパトリックスを持ちさえすれば, 同様に議論が進められる. そ

して一体動力学がセパトリックスを持つことは、大雑把には系が相転移することを意味する。つまり、微視的動力学に対し分子場が意味を持つこと、相転移すること、この二点を満たすような系において、このような集団運動が広く見られることが期待できる。実際、最近になって平均場 ϕ^4 (soft-Ising) 模型を調べたところ、同様の巨視的周期運動が観察された [14].

謝辞 本稿の内容は金子邦彦さん（東大総合文化）との共同研究によるものである。また、池田研介さん（立命館大理工）との議論が「その後の進展」を促した。

参考文献

- [1] K. Kaneko, Phys. Rev. Lett. **65**, 1391 (1990), erratum, **66**, 243 (1991); Physica D **55**, 368 (1992).
- [2] H. Chaté and P. Manneville, Prog. Theor. Phys. **87**, 1 (1992).
- [3] N. Nakagawa and Y. Kuramoto, Prog. Theor. Phys. **89**, 313 (1993); Physica D **80**, 307 (1995).
- [4] S. Sasa, Chaos **6**, 238 (1996).
- [5] T. Shibata and K. Kaneko, Europhys. Lett. **38**, 417 (1997); Physica D **124**, 177 (1998).
- [6] T. Shibata and K. Kaneko, Phys. Rev. Lett. **81**, 4116 (1998).
- [7] T. Shibata, T. Chawanya, and K. Kaneko, Phys. Rev. Lett. **82**, 4424 (1999).
- [8] H. Morita and K. Kaneko, in preparation; in preparation.
- [9] T. Konishi and K. Kaneko, J. Phys. A **25**, 6283 (1992).
- [10] S. Inagaki, Prog. Theor. Phys. **90**, 577 (1993).
- [11] M. Antoni and S. Ruffo, Phys. Rev. E **52**, 2361 (1995).
- [12] A. Pluchino, V. Latora, and A. Rapisarda, Physica D **193**, 315 (2004).
- [13] Y. Y. Yamaguchi et al., Physica A **377**, 36 (2004).
- [14] H. Morita, in preparation.